SIMULAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Introdução

Curso de Graduação em Engenharia Química
Professora – Mariana Lima Acioli Murari

Aplicação das Leis Fundamentais de Conservação

- **Equação da continuidade total**

$$\begin{pmatrix} \text{taxa de massa que} \\ \text{entra no elemento} \\ \text{de volume} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{taxa de massa que} \\ \text{sai do elemento} \\ \text{de volume} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{taxa de variação de} \\ \text{massa no elemento} \\ \text{de volume} \end{pmatrix}$$

- **Equação da continuidade de componente**

$$\begin{pmatrix} \text{taxa de massa} \\ \text{de } i \text{ que entra} \\ \text{no el. volume} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{taxa de massa} \\ \text{de } i \text{ que sai} \\ \text{do el. volume} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{taxa de geração} \\ \text{de massa de } i \\ \text{no el. volume} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{taxa de variação} \\ \text{de massa de } i \\ \text{no el. volume} \end{pmatrix}$$

Aplicação das Leis Fundamentais de Conservação

- **Equação da energia**

$$\begin{pmatrix}\text{taxa de energia interna,}\\ \text{cinética e potencial que}\\ \text{entram no E.V. por}\\ \text{advecção e/ou difusão}\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\text{taxa de energia interna,}\\ \text{cinética e potencial que}\\ \text{saem do E.V. por}\\ \text{advecção e/ou difusão}\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\text{taxa líquida de calor}\\ \text{adicionado ao E.V.}\\ \text{por condução e}\\ \text{radiação}\end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix}\text{taxa de geração}\\ \text{de calor no}\\ \text{E.V.}\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\text{taxa líquida de trabalho}\\ \text{feito pelo E.V. nas}\\ \text{vizinhanças}\\ (\text{trabalho de eixo} + P\overline{V})\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\text{taxa de variação de energia}\\ \text{interna, cinética e potencial}\\ \text{no E.V.}\end{pmatrix}$$

Aplicação das Leis Fundamentais de Conservação

- **Equação do movimento**

$$F = ma$$

$$\sum_{j=1}^{N} F_{ji} = \frac{d(M v_i)}{dt}$$

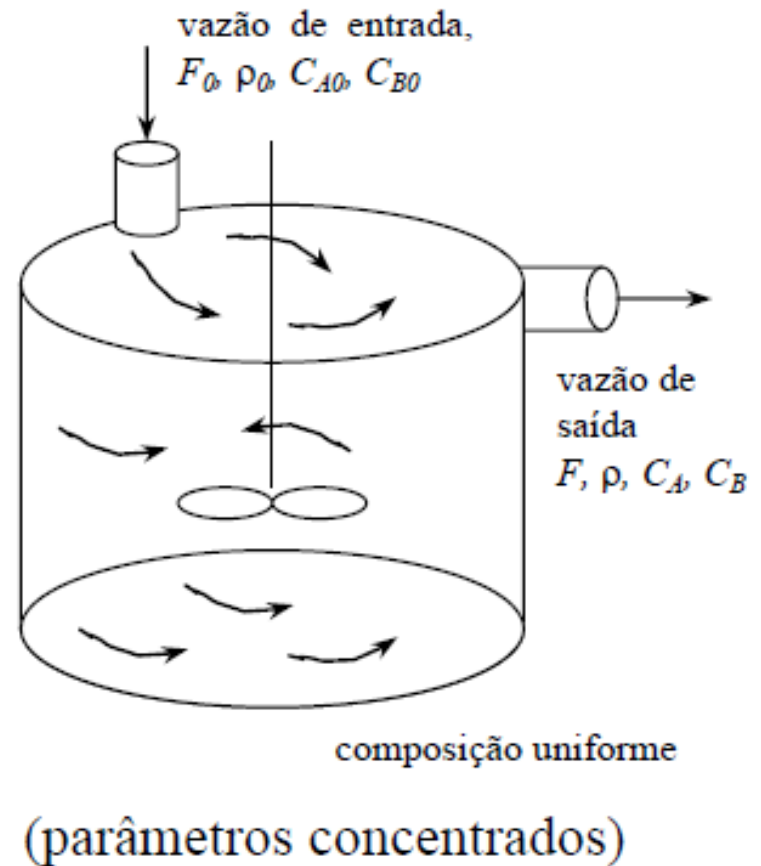
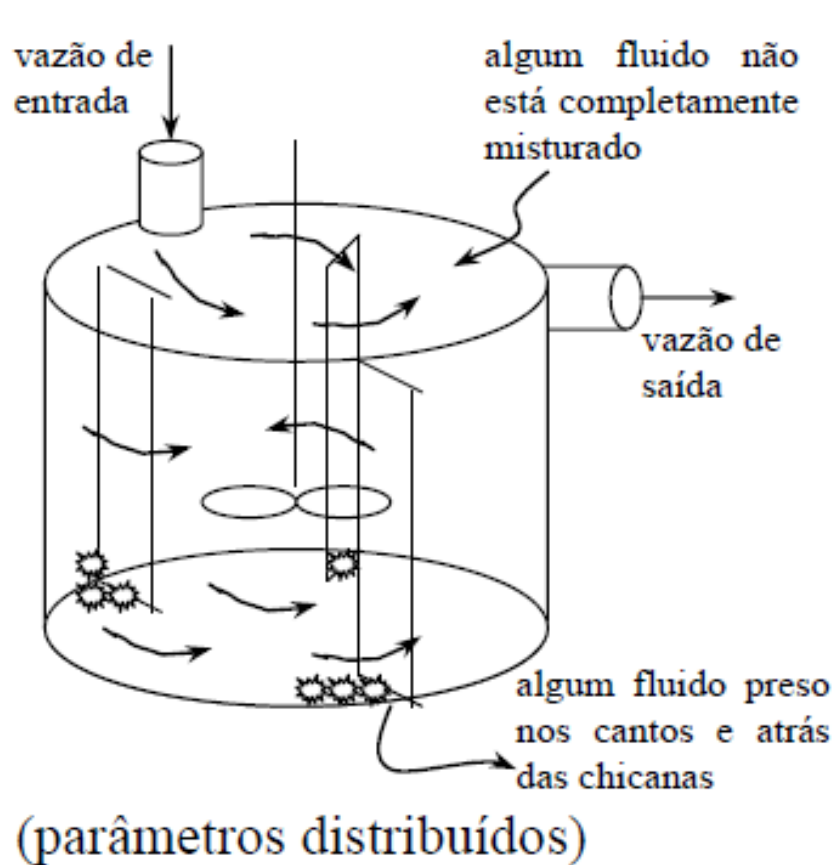
$$\begin{pmatrix} \text{taxa de quantidade} \\ \text{de movimento que} \\ \text{entra no E.V.} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{taxa de quantidade} \\ \text{de movimento que} \\ \text{sai do E.V.} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{soma das forças} \\ \text{que agem sobre} \\ \text{o E.V} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{taxa de variação} \\ \text{da quantidade de} \\ \text{movimento no E.V} \end{pmatrix}$$

Sistemas de Parâmetros Concentrados

Na formulação de modelos de parâmetros concentrados, as variáveis espaciais são ignoradas e as propriedades e variáveis de estado são consideradas homogêneas através de todo o sistema

Sistemas de Parâmetros Concentrados

(parâmetros distribuídos)

(parâmetros concentrados)

Sistemas de Parâmetros Concentrados

Balanço de massa: ($A \xrightarrow{k} B$)

Global: $$\frac{d(\rho V)}{dt} = F_0\rho_0 - F\rho$$

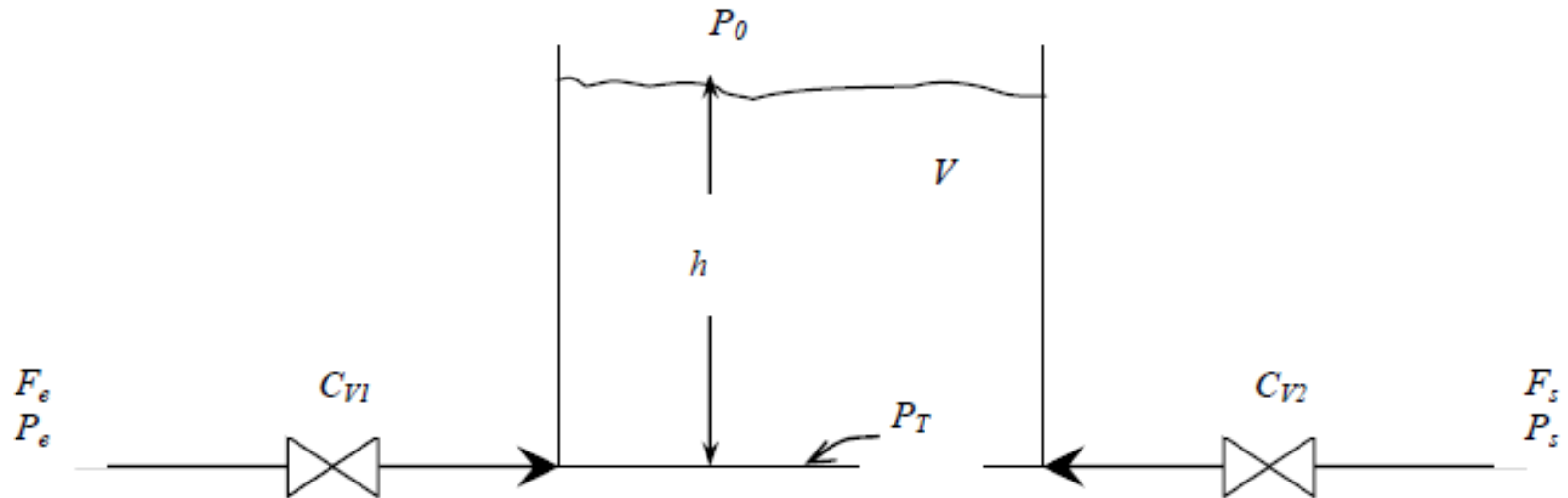
Componente: $$\frac{d(VC_A)}{dt} = F_0C_{A_0} - FC_A - (\text{-}r_A)V$$

$$\frac{d(VC_B)}{dt} = F_0C_{B_0} - FC_B + (\text{-}r_A)V$$

$$M_AC_A + M_BC_B = \rho$$

$L.D.$

Cinética: $$(\text{-}r_A) = kC_A$$

Exemplo

Descrição do processo: Um líquido entra e sai de um tanque devido a diferença de pressões. Deseja-se analisar a resposta do sistema frente a variação nas pressões das linhas.

Considerações:

- massa específica constante
- isotérmico
- mistura perfeita
- $F = C_V \sqrt{\Delta P}$

Exemplo

Equações:

Balanço de massa: $F_e \rho - F_s \rho = \rho \dfrac{dV}{dt}$

Dimensão: $V = Ah$

Hidrodinâmica: $F_e = C_{V_1} \sqrt{P_e - P_T}$

$F_s = C_{V_2} \sqrt{P_T - P_s}$

$P_T = P_0 + \rho g h$

Exemplo

Consistência:

Variáveis:

F_e, F_s	$(m^3\ s^{-1})$
P_e, P_s, P_T, P_0	(Pa)
C_{V_1}, C_{V_2}	$(m^3\ Pa^{-½}\ s^{-1})$
V	(m^3)
A	(m^2)
h	(m)
ρ	$(kg\ m^{-3})$
g	$(m\ s^{-2})$
t	(s)

constantes: $C_{V_1}, C_{V_2}, \rho, g\ A$ ⇒ 5

especificações: P_0, t ⇒ 2

forças motrizes: P_e, P_s ⇒ 2

9

variáveis a determinar:

F_e, F_s, V, h, P_T ⇒ 5

grau de liberdade

5 – 5

ZERO

Exemplo

Solução desejada:

Condição inicial: $h(t_0)$ ou $V(t_0)$

Analisar:

$$h(P_e, P_s), V(P_e, P_s), F_e(P_e, P_s), F_s(P_e, P_s), P_T(P_e, P_s)$$

Exemplo

Matemática e computação

$$F_e - F_s = \frac{dV}{dt}$$

$$V = Ah,\ F_e = C_{V_1}\sqrt{\Delta P_e}\ ,\ F_s = C_{V_2}\sqrt{\Delta P_s}$$

$$A\frac{dh}{dt} = C_{V_1}\sqrt{P_e - P_T} - C_{V_2}\sqrt{P_T - P_s}$$

$$P_T = P_0 + \rho g h$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{C_{V_1}}{A}\sqrt{P_e - P_0 - \rho g h} - \frac{C_{V_2}}{A}\sqrt{P_0 + \rho g h - P_s}$$

$$h(t_0) = h_0 \qquad \Rightarrow \qquad h(t, P_e, P_s)$$

$$V = Ah \qquad \Rightarrow \qquad V(t, P_e, P_s)$$

$$P_T = P_0 + \rho g h \qquad \Rightarrow \qquad P_T(t, P_e, P_s)$$

$$F_e = C_{V_1}\sqrt{\Delta P_e} \qquad \Rightarrow \qquad F_e(t, P_e, P_s)$$

$$F_s = C_{V_2}\sqrt{\Delta P_s} \qquad \Rightarrow \qquad F_s(t, P_e, P_s)$$

Exemplo

* No estado estacionário: $\frac{dV}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad F_e = F_s$

$$\left.\begin{aligned} F_e &= F_s \\ F_e &= C_{V_1}\sqrt{P_e - P_T} \\ F_s &= C_{V_2}\sqrt{P_T - P_s} \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad F_e,\ F_s,\ P_T$$

$$P_T = P_0 + \rho g h \quad \Rightarrow \quad h$$

$$V = Ah \quad \Rightarrow \quad V$$